

王洪波¹, 郭晓峰²

(1. 集美大学理学院, 福建 集美 361021; 2. 厦门大学数学科学学院, 福建 厦门 361005)

摘要: 用块循环矩阵理论讨论锯齿形开口纳米管(zigzag open-ended nanotubes)和柱面三格图, 柱面四格图, 柱面 4-8 格图, 柱面 4-6-8 格图的谱性质, 给出了它们的特征多项式和零维数.

关键词: 锯齿形开口纳米管; 柱面三格图; 柱面四格图; 柱面 4-8 格图; 柱面 4-6-8 格图; 特征多项式; 零维数

中图分类号: O157.5

文献标识码: A

Characteristic polynomials and nullities of some cylindrical graphs

WANG Hong-bo¹, GUO Xiao-feng²

(1. School of Sciences, Jimei University, Xiamen, Fujian 361021, China;

2. School of Mathematical Sciences, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China)

Abstract: In present paper by block circulant matrix theory we will discuss spectral properties of open-ended nanotubes, cylindrical 4-8 lattices, cylindrical 4-6-8 lattices, cylindrical lattices and cylindrical triangle lattices. We give the characteristic polynomials of them in some special cases.

Keywords: open-ended nanotube; cylindrical 4-8 lattice; cylindrical 4-6-8 lattice; cylindrical lattice; cylindrical triangle lattice; characteristic polynomial; nullity

0 引言

随着 C_{60} 的发现, 人们的注意力投向了纳米管的存在性问题. 碳纳米管由于其准一维的结构和众多新颖的物理性能而饱受各方面的关注. 1991 年, 日本化学家 Iijima 等^[1] 发现了第一个多壁碳纳米管. 两年后单壁碳纳米管(简记为 SWNTs) 分别由日本的 Iijima 等^[2] 和美国的 Bethune 等^[3] 独立发现. 1996 年 Thess 等人^[4] 合成了直线单层纳米管. 实验证明碳纳米管的许多物理和机械特性如硬度、弹性以及热传导性等都达到同类材料中的最优^[5]. 因此纳米管在许多领域中被关注和研究. 一个单壁纳米管通常有两个帽, 但在许多实际应用中, 整个纳米管的性质主要由开口纳米管来决定. 由于这个原因, 开口纳米管的性质被深入研究, 例如物理方面, Erkoc 等^[6] 讨论了小开口纳米管的电子结构; 在数学方面, Diudea 等^[7-8] 给出了开口纳米管的 Wiener 指数; 等^[9-10] 给出了开口纳米管的 Hosoya 多项式; 张福基等人^[11] 讨论了开口纳米管的 k -共振理论. 图的零维数是由 Collatz 和 Sino-gowitz^[12] 最早提出. 它反映了交错型碳氢化合物分子的不稳定性.

本文将讨论锯齿形开口纳米管的特征多项式. 柱面三格图, 柱面四格图, 柱面 4-8 格图, 柱面 4-6-8 格图性质的研究虽然不如纳米管多, 但这些图都有高度的对称性, 也具有一些非常好的物理或数学性质.

锯齿形开口纳米管可以看做是一个能嵌入到柱面且内部面的边界均是六边形的二部图. 它可以由一个 $(p+1) \times q$ 的平行四边形网格 M 按如下方式生成: 设 P_1 是 M 中的一个 $p \times (q-1)$ 平行四边形, 其中 P_1 的每条边都连接六边形的两个中心, P_1 的两条水平边和斜边分别垂直通过 M 的 p 条边和 $q-1$ 条边. 把

收稿日期: 2013-03-22

通讯作者: 王洪波(1973-), 讲师, 主要从事组合图论研究, hxlab@126.com

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11171279 11301217); 李尚大集美大学学科建设基金资助项目(ZC2013014); 集美大学科研预研基金资助项目(ZQ2013003)

P_1 的两条斜边粘结起来, 就可以得到锯齿形开口纳米管, 如图 1 (a) 所示. 把这样生成的锯齿形开口纳米管记作 $H^c(p, q)$.

柱面 4-8 格图, 柱面 4-6-8 格图, 柱面四格图, 柱面三格图也可透过类似的方式得到 (参见图 1 (b), (c), (d), (e)), 我们把这些图分别记为 $SO^c(p, q)$, $SHO^c(p, q)$, $S^c(p, q)$, $T^c(p, q)$. 显然, 这些图都是块循环图 (即其邻接矩阵均可表示为块循环矩阵).

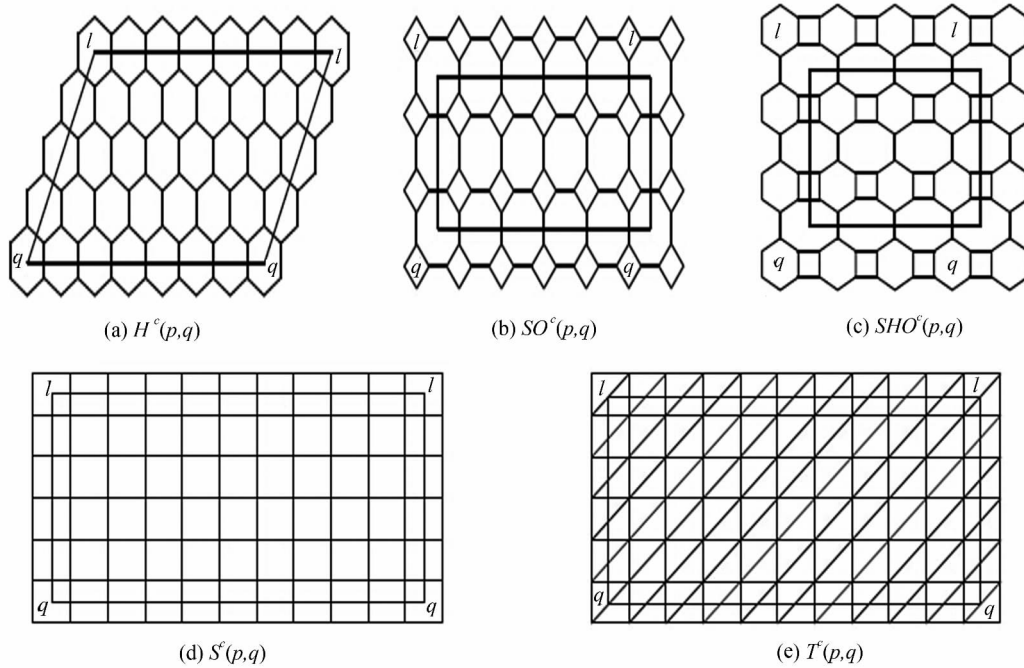


图 1 常见的柱面格子图

Fig. 1 Common cylindrical lattices

1 预备知识

定义 1 设 Γ 是一个多重有向图, 其顶点集记作 $V(\Gamma) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, 有向边 (或弧) 集记为 $E(\Gamma) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$. f 是一个从 $E(\Gamma)$ 到复数域 C 的映射, 则称 $\langle \Gamma, f \rangle$ 是一个带权多重有向图. 对任意 $e \in E(\Gamma)$, 称 $f(e)$ 为 e 的权. 一个非赋权有向图可看作每条弧都赋权为 1 的特殊赋权有向图.

定义 2 设 Γ 是赋权多重有向图, 称 $A(\Gamma) = (a_{ij})_{n \times n}$ 为 Γ 的邻接矩阵, 其中 a_{ij} 表示 Γ 中所有从 v_i 到 v_j 的弧的权之和, 若 Γ 中有从 v_i 到 v_j 的弧; 否则 $a_{ij} = 0$. Γ 的特征多项式定义为

$$\Phi(\Gamma; \lambda) = \det(\lambda I_n - A(\Gamma))$$

显然 $\Phi(\Gamma; \lambda)$ 是一个次数为 n 的多项式, 首项系数为 1.

定义 3 称有向图 Γ 的特征多项式 $\Phi(\Gamma; \lambda)$ 的根, 也就是 $A(\Gamma)$ 的特征值为 Γ 的特征值. Γ 的所有特征值连同特征值的重数构成了 Γ 的邻接谱, 简称为谱.

显然若 $A(\Gamma)$ 是一个 Hermite 矩阵, 则 $A(\Gamma)$ 全是实数.

定义 4 有向图 Γ 的零特征值的代数重数称作 Γ 的零维数.

定义 5 设有向图 Γ 的顶点集 $V(\Gamma)$ 是两个互不相交的集合 U, W (U, W 可以是空集) 的并, 使得 Γ 中任何一条弧的起点和终点分别在 U, W 中, 则称 Γ 是一个具有二部剖分 U 和 W 的有向二部图. 设 $U = \{u_1, u_2, \dots, u_p\}$ 和 $W = \{w_1, w_2, \dots, w_q\}$, 这里 $p + q = n$, n 是顶点数. 称 $B = (b_{ij})_{p \times q}$ 为 U 和 W 的双邻接矩阵, 这里 b_{ij} 是从顶点 u_i 到 w_j 所有弧的权的和, 若 Γ 中有从顶点 u_i 到 w_j 的弧; 否则 $b_{ij} = 0$ ($1 \leq i \leq p, 1 \leq j \leq q$).

显然若给图 Γ 的顶点一个排序, 使得 U 中的顶点在前, W 的顶点在后, 则 $A(\Gamma)$ 就具有如下形式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0}_p & B(\Gamma) \\ B^T(\Gamma) & \mathbf{0}_q \end{pmatrix}$$

这里, $B^T(\Gamma)$ 是双邻接矩阵 $B(\Gamma)$ 的转置. 为了方便起见, 把阶数为 p 的全 $\mathbf{0}$ 矩阵记为 $\mathbf{0}_p$, 阶数为 p 的单位矩阵记为 I_p .

定义 6 $A = (A_{ij})_{m \times m}$ 被称为块循环矩阵, 若对任意 $1 \leq i, j \leq m, A_{ij} = A_{i, j-i+1}$. 记为 $A = C(A_{11}, A_{12}, \dots, A_{1m})$. 这里 A_{ij} 是 $n \times n$ 矩阵且加法是模 m 的加法. 特别地, 当所有的 A_{ij} 都是一阶时, A 被称为循环矩阵. 若一个图的邻接矩阵合同于(块)循环矩阵, 则称该图为(块)循环图. 以 $A_{ii}(1 \leq i \leq n)$ 为邻接矩阵的导出子图 G_i 被称为 G 的块. 显然, 块 G_1, G_2, \dots, G_m 两两同构.

引理 1^[13] 若 α, β 是两个复数, 则

$$P_n(\lambda; \alpha, \beta) = \det \begin{pmatrix} \lambda - \alpha & -\beta & & & & \\ -\bar{\beta} & \lambda - \alpha & -\beta & & & \\ & -\bar{\beta} & \lambda - \alpha & -\beta & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\bar{\beta} & \lambda - \alpha & -\beta \\ & & & & -\bar{\beta} & \lambda - \alpha \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n+1}{2k+1} (\lambda - \alpha)^{n-2k} (\lambda^2 - 2\alpha\lambda + \alpha^2 - 4\beta\bar{\beta})^k$$

引理 2^[14] 设 $A = C(A_0, A_1, \dots, A_{m-1})$ 是一个 m 阶块循环矩阵, 其中 A_0, A_1, \dots, A_{m-1} 是 n 阶方阵.

令 $f(x) = A_0 + A_1x + \dots + A_{m-1}x^{m-1}$ 是一矩阵多项式, 则 $\det(\lambda I_m - A) = \prod_{i=0}^{m-1} \det(\lambda I_n - f(\theta^i))$, 其中 $\theta = e^{\frac{2\pi i}{m}}, i^2 = -1$.

引理 3 设 G 是无向块循环图, 其顶点集为 $\{v_1^1, v_2^1, \dots, v_m^1, \dots, v_1^2, v_2^2, \dots, v_m^2, \dots, v_1^n, v_2^n, \dots, v_m^n\}$. 设 m 阶块循环矩阵 $C(A_0, A_1, \dots, A_{n-1})$ 是相应的邻接矩阵且 $A_r = (a_{jk}^r)_{m \times m}$, 其中 $a_{jk}^r = 1$ 当且仅当 G 中有一条从 v_j^1 到 v_k^{r+1} 的边; 否则 $a_{jk}^r = 0, 1 \leq j, k \leq m, 1 \leq r \leq n-1$. 则

$$\Phi(G; \lambda) = \prod_{s=0}^{n-1} \Phi(\Gamma_s; \lambda)$$

这里 Γ_s 是一由 $(v_2^1, v_2^1, \dots, v_m^1)$ 导出的子图获得的赋权有向图: 把从 v_j^1 到 v_k^1 的弧的权增加 $\sum_{r=1}^{n-1} a_{jk}^r \theta^{rs}$, $a_{jk}^r = a_{kj}^{n-r}$.

证明 设 G_1 是由 $\{v_2^1, v_2^1, \dots, v_m^1\}$ 导出的子图, 则 A_0 是 G_1 的邻接矩阵, 即 $A_0 = A(G_1)$. 设 $f(x) = A(G_1) + A_1x + \dots + A_{n-1}x^{n-1}$, 这里可把 $f(x)$ 看作某一个由 G_1 获得的赋权有向图的邻接矩阵: 把从 v_j^1 到 v_k^1 的弧的权增加 $\sum_{r=1}^{n-1} a_{jk}^r x^r$. 因为 G 是块循环无向图, 则 $A_r = A_{n-r}^T$, 即 $a_{jk}^r = a_{kj}^{n-r} (1 \leq j, k \leq m)$. 由引理 2 知

$$\Phi(G^*; \lambda) = \prod_{s=0}^{n-1} \det(\lambda I_m - f(\theta^s)) = \prod_{s=0}^{n-1} \Phi(\Gamma_s; \lambda)$$

这里 Γ_s 是一由有向生成子图 G_1 按如下方式获得的赋权有向图: 把从 v_j^1 到 v_k^1 的弧的权增加 $\sum_{r=1}^{n-1} a_{jk}^r \theta^{rs}$, $a_{jk}^r = a_{kj}^{n-r}$. 证毕

2 锯齿形开口纳米管的特征多项式和谱

定理 1 设 p, q 是正整数, $H^C(p, q)$ 是锯齿形开口纳米管, $H^C(p, q)$ 则的特征多项式为

$$\Phi(H^C(p, q); \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \left\{ \frac{\lambda^2 - \alpha + 1}{2q} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q}{2} \rfloor} \binom{q+1}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \right\}$$

$$-\frac{\alpha-1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} \binom{q}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-1-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \}$$

这里 $\alpha = 3 + 2\cos \frac{2\pi j}{p}$.

证明 首先给开口纳米管顶点一个如图 2(a) 所示的标号. 显然, $H^C(p, q)$ 是一个块为 G_1, G_2, \dots, G_p 的块循环图, 其中 $V(G_i) = \{x_1^i, y_1^i, x_2^i, y_2^i, \dots, x_{q+1}^i, y_{q+1}^i\}$, $i = 1, 2, \dots, p$. 由引理 3 知

$$\Phi(H^C(p, q); \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \Phi(\Gamma_j; \lambda)$$

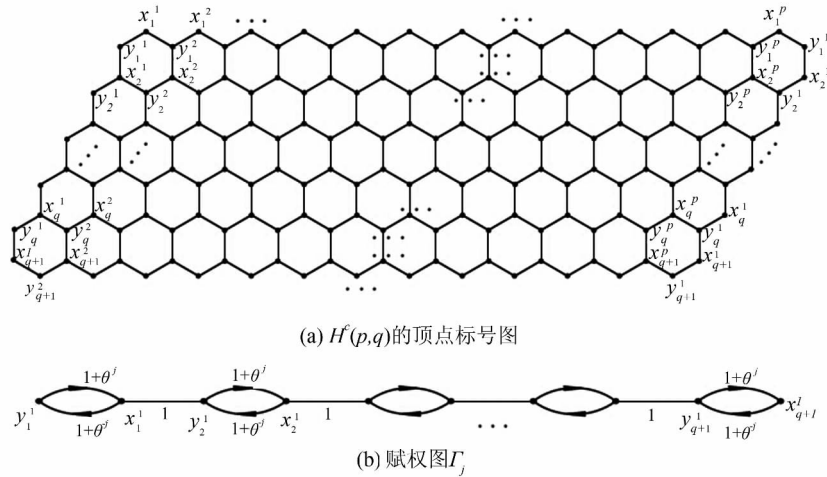


图 2 定理 2 证明中的图

Fig. 2 Graphs using in proof of theorem 2

这里 Γ_j 是如图 2(b) 所示的赋权有向图, 其中无向边表示一对权数相同方向相反的弧且 $\theta = e^{\frac{2\pi i}{p}}$. 设 B_j 是 $V_1 = \{x_1^j, x_2^j, \dots, x_{q+1}^j\}$ 和 $V_2 = \{y_1^j, y_2^j, \dots, y_{q+1}^j\}$ 的双邻接矩阵, 则

$$B_j = \begin{pmatrix} \beta & & & & & & \\ 1 & \beta & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & 1 & \beta & & \\ & & & & 1 & \beta & \\ & & & & & & \beta \end{pmatrix} \quad \text{且 } \overline{B_j^T} B_j = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & & & & & \\ \overline{\beta} & \alpha & \beta & & & & \\ & \beta & \alpha & \beta & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta & \overline{\beta} & & \\ & & & & \alpha & \beta & \\ & & & & \overline{\beta} & \alpha - 1 & \end{pmatrix}$$

这里: $\alpha = 3 + 2\cos \frac{2\pi j}{p}$; $\beta = 1 + \theta^j$.

故 $A(\Gamma_j) = \begin{pmatrix} 0 & B_j \\ \overline{B_j^T} & 0 \end{pmatrix}$ 且

$$\det(\lambda I_{2(q+1)} - A(\Gamma_j)) = \det \begin{pmatrix} \lambda I_{q+1} & -B_j \\ -\overline{B_j^T} & \lambda I_{q+1} \end{pmatrix} = \det(\lambda^2 I_{q+1} - \overline{B_j^T} B_j)$$

$$= \det \begin{pmatrix} \alpha^* & -\beta & & & & & \\ -\overline{\beta} & \alpha^* & -\beta & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & -\overline{\beta} & \alpha^* & -\beta & \\ & & & & -\overline{\beta} & \alpha^* + 1 & \end{pmatrix}$$

这里 $\alpha^* = \lambda^2 - \alpha$.

行列式按第一行展开得,

$$\det(\lambda_{2(q+1)} - A(\Gamma_j)) = (\alpha^* + 1) P_q(\lambda; \alpha, \beta) + \beta \det \begin{pmatrix} \alpha^* & -\beta & & & \\ -\beta & \alpha^* & -\beta & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\beta & \alpha^* & -\beta \\ & & & & -\beta \\ & & & & & -\beta \end{pmatrix}$$

(第二个行列式按最后一行展开)

$$\begin{aligned} &= (\alpha^* + 1) P_q(\lambda; \alpha, \beta) - \beta \bar{\beta} P_{q-1}(\lambda; \alpha, \beta) \\ &= \frac{\lambda^2 - \alpha + 1}{2^q} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q}{2} \rfloor} \binom{q+1}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \\ &\quad - \frac{\alpha - 1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} \binom{q}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-1-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \end{aligned}$$

故
$$\Phi(H^C(p, q); \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \left\{ \frac{\lambda^2 - \alpha + 1}{2^q} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q}{2} \rfloor} \binom{q+1}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \right. \\ \left. - \frac{\alpha - 1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} \binom{q}{2k+1} (\lambda^2 - \alpha)^{q-1-2k} (\lambda^4 - 2\alpha\lambda^2 + \alpha^2 - 4\alpha + 4)^k \right\}$$

证毕.

推论 1 设 p 是正整数, 则六角形回路 $H^C(p, 1)$ 的谱

$$\left\{ \pm \sqrt{\frac{1}{2}(5 + 4\cos \frac{2\pi j}{p})} \pm \sqrt{9 + 8\cos \frac{2\pi j}{p}} \mid j = 0, 1, \dots, p-1 \right\}$$

证明 由定理 1 知, $\Phi(H^C(p, 1); \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \left\{ [\lambda^2 - (3 + 2\cos \frac{2\pi j}{p})][\lambda^2 - (2 + \cos \frac{2\pi j}{p})] - (2 + 2\cos \frac{2\pi j}{p}) \right\}$.

显然六角形回路 $H^C(p, 1)$ 的谱为

$$\left\{ \pm \sqrt{\frac{1}{2}(5 + 4\cos \frac{2\pi j}{p})} \pm \sqrt{9 + 8\cos \frac{2\pi j}{p}} \mid j = 0, 1, \dots, p-1 \right\}$$

证毕.

3 柱面 4 - 8 格图和柱面 4 - 6 - 8 格图的特征多项式和零维数

对一般的柱面 4 - 8 格图 $SO^C(p, q)$ 和 4 - 6 - 8 格图 $SHO^C(p, q)$, 虽然用矩阵论的方法能将它们的特征多项式分解成更小的赋权图的特征多项式的乘积, 不过由于这些小赋权图的特征多项式往往仍然无法求, 故采用这个方法求它们的特征多项式是一个很难的问题. 不过对一些特殊的 q , 这个问题很容易解决.

定理 2 设 p 是正整数, $SO^C(p, 2)$ 是柱面 4 - 8 格图, 则 $SO^C(p, 2)$ 的特征多项式为

$$\Phi(SO^C(p, 2), \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \left\{ \lambda^4 - (-1)^k \lambda^3 - 5\lambda^2 + [3(-1)^k - 4\cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda + 2(-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p} \right\}$$

证明 首先给 $SO^C(p, 2)$ 的顶点如图 3(a) 所示标号. 令 $V_i = \{a_i^1, b_i^1, c_i^1, d_i^1, a_i^2, b_i^2, c_i^2, d_i^2\}$ 且 G_i 是由 V_i 导出的子图, $i = 1, 2, \dots, p$. 则 $SO^C(p, 2)$ 是一个含有块 G_1, G_2, \dots, G_p 的块循环图. 于是由引理 3 知,

$$\Phi(SO^C(p, 2), \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \Phi(\Gamma_j; \lambda)$$

这里 Γ_j 是如图 3(b) 所示的赋权有向图, 其中图中无向边表示一对权数均为 1 的方向相反的弧, $\theta = e^{\frac{2\pi j}{p}}$. 又令 $V^l = \{a_l^1, b_l^1, c_l^1, d_l^1\}$ 且 H_j^l 是 Γ_j 中由 V^l 导出的子图. 再由引理 3 知,

$$\Phi(\Gamma_j; \lambda) = \prod_{k=0}^1 \Phi(\Gamma_{jk}; \lambda)$$

这里 Γ_{jk} 是如图 3(c) 所示的赋权有向图, 其中无向边表示一对权数均为 1 且方向相反的弧, $\theta = e^{\frac{2\pi i}{p}}$. 故 $SO^C(p, 2)$ 的特征多项式为

$$\begin{aligned} \Phi(SO^C(p, 2), \lambda) &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \det(\lambda I_4 - A(\Gamma_{jk})) \\ &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \det \begin{pmatrix} \lambda & -1 & -1 & 0 \\ -1 & \lambda & -\theta^{-j} & -1 \\ -1 & -\theta^j & \lambda & -1 \\ 0 & -1 & -1 & \lambda - (-1)^k \end{pmatrix} \\ &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \left\{ \lambda^4 - (-1)^k \lambda^3 - 5\lambda^2 + [3(-1)^k - 4\cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda + 2(-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p} \right\} \end{aligned}$$

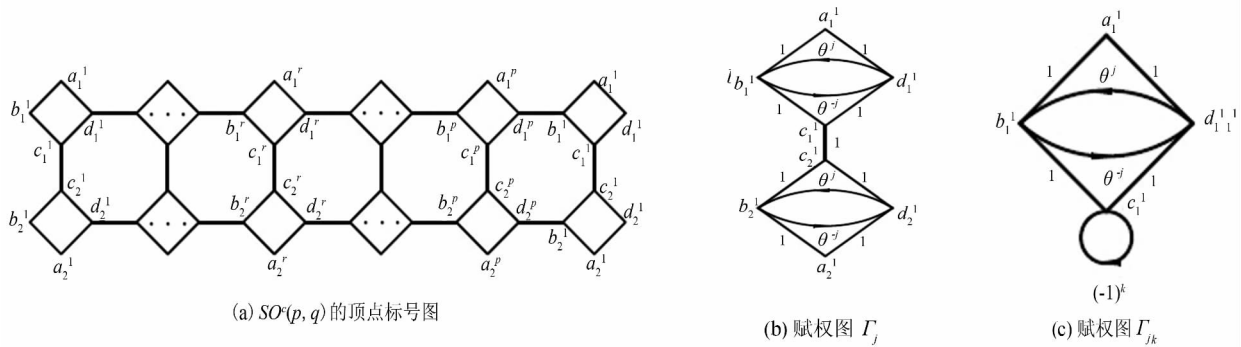


图 3 定理 3 证明中的图

Fig. 3 Graphs using in proof of theorem 3

推论 2 当 p 是 4 的倍数时, $SO^C(p, 2)$ 的零维数为 4; 当 p 不是 4 的倍数时, $SO^C(p, 2)$ 的零维数为 0 (即没有零特征值).

证明 定理 2 给出 $SO^C(p, 2)$ 的特征多项式一个因式分解, 每一对 (j, k) 都对应一个因式. 因为 $\frac{2\pi j}{p} \in [0, 2\pi)$, 所以 $2(-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p} = 0$ 当且仅当 $j = \frac{p}{4}$ 或 $j = \frac{3p}{4}$.

当 $j = \frac{p}{4}$ 或 $j = \frac{3p}{4}$ 时, $\lambda^4 - (-1)^k \lambda^3 - 5\lambda^2 + [3(-1)^k - 4\cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda + 2(-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p} = \lambda^4 - (-1)^k \lambda^3 - 5\lambda^2 + 3(-1)^k \lambda^k$. 显然 $(-1)^k \neq 0$. 故当 p 是 4 的倍数时, $(\frac{p}{4}, 0), (\frac{p}{4}, 1), (\frac{3p}{4}, 0), (\frac{3p}{4}, 1)$ 对应的因式为 $SO^C(p, 2)$ 均只贡献一个零特征值, $SO^C(p, 2)$ 的零维数为 4. 当 p 不是 4 的倍数时, 每一对 (j, k) 对应的因式都不会产生零特征值. 故 $SO^C(p, 2)$ 的零维数为 0. 证毕.

推论 3 $\{-1, -1, -2\}$ 是所有 $SO^C(p, 2)$ 的公共整数特征值.

证明 由定理 2, $\Phi(SO^C(p, 2), \lambda)$ 含有因式

$$(\lambda^4 - \lambda^3 - 5\lambda^2 - \lambda + 2)(\lambda^4 + \lambda^3 - 5\lambda^2 - 7\lambda - 2)$$

而这个因式有二重根 -1 , 一重根 -2 . 证毕.

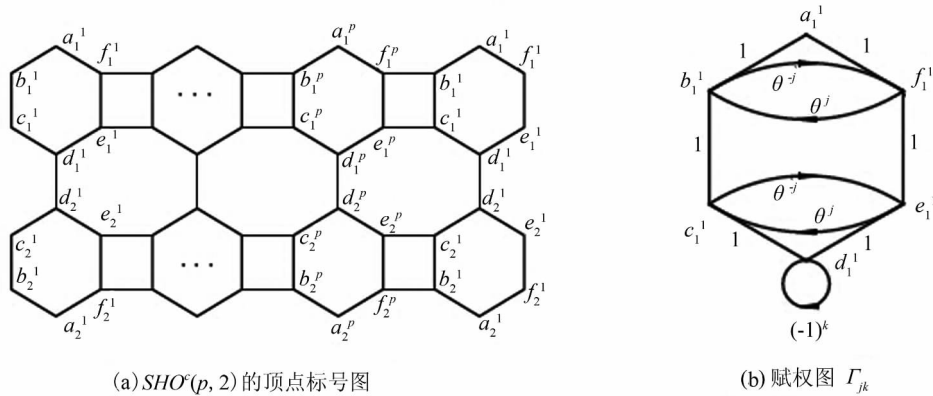
定理 3 设 p 是正整数, $SHO^C(p, 2)$ 是一柱面 $4-6-8$ 格图, 则 $SHO^C(p, 2)$ 的特征多项式为

$$\begin{aligned} \Phi(SHO^C(p, 2), \lambda) &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \left\{ \lambda^6 - (-1)^k \lambda^5 - 8\lambda^4 + 2[3(-1)^k - 2\cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda^3 \right. \\ &\quad \left. + 2[6 + (-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda^2 + 4[2\cos \frac{2\pi j}{p} - (-1)^k] \lambda + 2\cos \frac{4\pi j}{p} - 2 \right\} \end{aligned}$$

证明 给 $SHO^C(p, 2)$ 的顶点如图 4(a) 所示. 类似于定理 2, 易知 $A(T_{4-6-8}(p, 2))$ 相似于

$\bigoplus_{j=0}^{p-1} \bigoplus_{k=0}^1 A(\Gamma_{jk})$, 这里 Γ_{jk} 是如图 4(b) 所示的赋权图, 其中无向边表示一对权数相同方向相反的弧且 $\theta = e^{\frac{2\pi i}{p}}$. 故 $SHO^C(p, 2)$ 的特征多项式为

$$\begin{aligned} \Phi(T_{4-6-8}(P, 2), \lambda) &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \det(\lambda I_6 - A(\Gamma_{jk})) \\ &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \det \begin{pmatrix} \lambda & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & \lambda & -1 & 0 & 0 & -\theta^{-j} \\ 0 & -1 & \lambda & -1 & -\theta^{-j} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \lambda - (-1)^k & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\theta^j & -1 & \lambda & -1 \\ -1 & -\theta^j & 0 & 0 & -1 & \lambda \end{pmatrix} \\ &= \prod_{j=0}^{p-1} \prod_{k=0}^1 \left\{ \lambda^6 - (-1)^k \lambda^5 - 8\lambda^4 + 2[3(-1)^k - 2\cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda^3 \right. \\ &\quad \left. + 2[6 + (-1)^k \cos \frac{2\pi j}{p}] \lambda^2 + 4[2\cos \frac{2\pi j}{p} - (-1)^k] \lambda + 2\cos \frac{4\pi j}{p} - 2 \right\} \end{aligned}$$



(a) $SHO^C(p, 2)$ 的顶点标号图

(b) 赋权图 Γ_{jk}

图 4 定理 4 证明中的图

Fig. 4 Graphs Using in proof of Theorem 4

推论 4 当 p 是奇数时, $SHO^C(p, 2)$ 的零维数为 2; 当 p 是偶数时, $SHO^C(p, 2)$ 的零维数为 4.

证明 由于定理 3 给出的 $SHO^C(p, 2)$ 特征多项式一个因式分解. 每一对 (j, k) 对应一个因式. 因为 $\frac{4\pi j}{p} \in [0, 4\pi)$, 所以 $2\cos \frac{4\pi j}{p} - 2 = 0$ 当且仅当 $j = 0$ 或 $j = \frac{p}{2}$.

当 $j = 0$ 时, $(0, k)$ 对应的因式变为 $\lambda^6 - (-1)^k \lambda^5 - 8\lambda^4 + 2[3(-1)^k - 2]\lambda^3 + 2[6 + (-1)^k]\lambda^2 + 4[2 - (-1)^k]\lambda$. 显然 $2 - (-1)^k \neq 0$.

当 $j = \frac{p}{2}$ 时, $(\frac{p}{2}, k)$ 对应的因式变为 $\lambda^6 - (-1)^k \lambda^5 - 8\lambda^4 + 2[3(-1)^k + 2]\lambda^3 + 2[6 - (-1)^k]\lambda^2 + 4[-2 - (-1)^k]\lambda$. 显然 $-2 - 1(-1)^k \neq 0$.

当 $j = 0$ 或 $j = \frac{p}{2}$ 时, 每一对 (j, k) 对应的因式最多只能为 $SHO^C(p, 2)$ 贡献一个零特征值. 由此当 p 是奇数时, $SHO^C(p, 2)$ 的零维数为 2; 当 p 是偶数时, $SHO^C(p, 2)$ 的零维数为 4. 证毕.

推论 5 $\{-2, -2, -1, 0, 0\}$ 是所有的 $SHO^C(p, 2)$ 公共的整数特征值.

证明 由定理 3, $\Phi(SHO^C(p, 2), \lambda)$ 含有因式 $\lambda^2(\lambda^5 - \lambda^4 - 8\lambda^3 + 2\lambda^2 + 14\lambda + 4)(\lambda^5 + \lambda^4 - 8\lambda^3 - 10\lambda^2 + 10\lambda + 12)$. 而这个因式有二重根 $-2, 0$, 一重根 -1 . 证毕.

4 柱面四格图和柱面三格图的特征多项式和谱

引理 4^[15] 长度为 $n - 1$ 的路 P_n 的谱为 $\{2\cos \frac{\pi i}{n+1} \mid i = 1, 2, \dots, n\}$.

定理 4 设 p, q 是正整数, $T^C(p, q)$ 是柱面三格图, 则 $T^C(p, q)$ 的特征多项式为

$$\Phi(T^C(p, q); \lambda) = \frac{1}{2^{p(q+1)}} \prod_{j=0}^{p-1} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q}{2} \rfloor} \binom{q+2}{2k+1} (\lambda - \alpha^*)^{q-2k} [(\lambda - \alpha^*)^2 - 16\beta^*]^k$$

这里: $\alpha^* = 2\cos \frac{2\pi j}{p}$; $\beta^* = \cos^2 \frac{\pi j}{p}$.

证明 首先给 $T^C(p, q)$ 的顶点如图 5(a) 所示的标号. 令 $V_i = \{x_1^i, x_2^i, \dots, x_{q+1}^i\}$ 且 G_i 是 $S^t(p, q, r)$ 中由 V_i 导出的子图 ($1 \leq i \leq p$), 显然 G_1, G_2, \dots, G_{q+1} 是两两同构的且 $T^C(p, q)$ 是含有块 G_1, G_2, \dots, G_{q+1} 的循环图. 由引理 3 知,

$$\Phi(T^C(p, q); \lambda) = \prod_{j=0}^{p-1} \Phi(\Gamma_j; \lambda)$$

这里 Γ_j 是如图 5(b) 所示的赋权有向图, 其中 $\theta = e^{\frac{2\pi i}{p}}$. 显然,

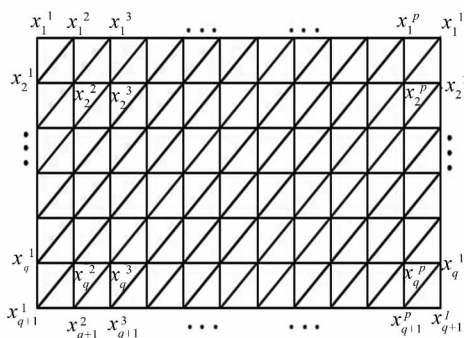
$$A(\Gamma_j) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & & & \\ \bar{\beta} & \alpha & \beta & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \bar{\beta} & \alpha & \beta \\ & & & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

这里: $\alpha = \theta^j + \theta^{-j} = 2\cos \frac{2\pi j}{p}$; $\beta = 1 + \theta^j$.

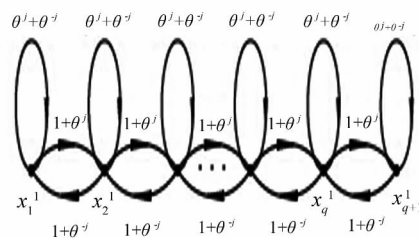
故由引理 1 得,

$$\Phi(T^C(p, q); \lambda) = \frac{1}{2^{p(q+1)}} \prod_{j=0}^{p-1} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{q}{2} \rfloor} \binom{q+2}{2k+1} (\lambda - \alpha^*)^{q-2k} [(\lambda - \alpha^*)^2 - 16\beta^*]^k$$

这里: $\alpha^* = 2\cos \frac{2\pi j}{p}$; $\beta^* = \cos^2 \frac{\pi j}{p}$. 证毕.



(a) $T^C(p, q)$ 的顶点标号图



(b) 赋权图 Γ_j

图 5 定理 4 证明中的图

Fig. 5 Graphs Using in proof of Theorem 4

推论 6 $2 + 4\cos \frac{\pi i}{p+2}$ ($i = 1, 2, \dots, q+1$) 是所有 $T^C(p, q)$ 公共的特征值.

证明 注意到在定理 4 的证明中, 当 $j = 0$ 时, $A(\Gamma_0) = 2 [I_{q+1} + 2A(P_{q+1})]$, 其中 P_{q+1} 是一条长度

为 q 的路. 由引理 4 即可得, $2 + 4\cos \frac{\pi i}{p+2}$ ($i = 1, 2, \dots, q+1$) 是所有 $T^c(p, q)$ 公共的特征值. 证毕.

$S^c(p, q)$ 的谱, 类似于 $T^c(p, q)$ 用矩阵论方法很容易得到.

定理 5^[16] 设 p, q 是正整数, $S^c(p, q)$ 是一柱面四格图, 则 $S^c(p, q)$ 的谱为

$$\left\{ 2\cos \frac{2\pi j}{p} + 2\cos \frac{\pi i}{q+2} \mid i = 1, 2, \dots, q+1; k = 0, 1, \dots, p-1 \right\}$$

参考文献:

- [1] Iijima S. Helical icrotubules of graphitic carbon[J]. Nature, 1991, 354: 56–58.
- [2] Iijima S, Ichihashi T. Single shell carbon nanotubes of one nanometer diameter[J]. Nature, 1993, 363: 603–605.
- [3] Bethume D S, Kiang C H, Devries M S, et al. Cobalt catalyzed growth of carbon nanotubes with single atomic layer walls[J]. Nature, 1993, 363: 605–607.
- [4] Thess A, Lee R, Nikolaev P, et al. Crystalline ropes of metallic carbon nanotubes[J]. Science, 1996, 273(5274): 483–487.
- [5] Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Avonris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties and applications[M]. Berlin: Springer-Verlag, 2001.
- [6] Erkoç S, Turker L. Electronic structure of carbon nanotubes[J]. Physica E, 1999, 4: 192–195.
- [7] Diudea M V. Hosoya polynomial in tori[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2002, 45: 109–122.
- [8] Diudea M V, Stefu M, Barv P, et al. Wiener index of armchair polyhex nanotubes[J]. Croat Chem Acta, 2004, 77(1/2): 111–115.
- [9] Xu Shou-jun, Zhang He-ping, Diudea M V. Hosoya polynomials of zigzag open-ended nanotubes[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2007, 57: 443–456.
- [10] Xu Shou-jun, Zhang He-ping, Diudea M V. Hosoya polynomials of armchair open-ended nanotubes[J]. Int J Quantum Chem, 2007, 107(3): 586–596.
- [11] Zhang Fu-ji, Wang Lu-sheng. k-resonant of open-ended carbon nanotubes[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2004, 35: 87–103.
- [12] Collatz L, Sinogowitz U. Spektren endlichern grafen[J]. Abh Math Sem Univ Hamburg, 1957, 21(1): 63–77.
- [13] 樊辉, 钱吉林, 岑嘉评, 等. 代数学辞典[M]. 湖北: 华中师范大学出版社, 1994.
- [14] 张贤达. 矩阵分析与应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004.
- [15] Cvetkovic D, Doob D, Sachs H. Spectra of graphs: Theory and applications[M]. New York: Academic Press, 1980.
- [16] John P E, Sachs H, Spectra of toroidal graphs[J]. Discrete Mathematics, 2009, 309(9): 2 663–2 681.

(责任编辑: 林晓)